TITLE:
拡散を含んだある化学反応方程式について (発展方程式とその数値解析研究会報告集)

AUTHOR(S):
三村, 昌泰

CITATION:
三村, 昌泰. 拡散を含んだある化学反応方程式について (発展方程式とその数値解析研究会報告集). 数理解析研究所講究録 1969, 69: 81-94

ISSUE DATE:
1969-03

URL:
http://hdl.handle.net/2433/107911

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

数理解析研究所講究録
69巻 1969年 81-94

拡散を含んだある化学反応方程式について

京大 工 三村昌泰

§1 序

一般に化学反応には、拡散を伴う系が数多く見受けられるが、従来、化学工学等では、空間的には定常な系として考え、それらを表わす方程式を常微分方程式として取り扱ってきたことは良く知られている。しかしながら実際問題として、空間的にも非定常であり、更に境界条件が導入される場合がしばしばある。[2] そのために、どうしても空間的、時間的変化を考察する必要があり、系を偏微分方程式として取り扱いなければならない。そこで、ここではこうした問題の中で、その一例である、拡散する物質と拡散しない物質が反応する（immolilizing reaction）場合の初期値問題を考えることにする。[4][ ] このようなI-R系を表わす式を数学的にみれば、ある意味で、発展方程式系の中で 放物型にも双曲型にも属さない方程式と考えられるから、ここでは「縮退」した拡散系とでも呼ぼう。

§2

問題

次式で与えられる初期値問題を $R^T=(-\infty<x<\infty,\ 0\leq t\leq T)$ において考える。

$$
(1.1)\quad
\begin{cases}
\dfrac{\partial u_1}{\partial t} = d\dfrac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - d_1 u_1 u_4 - d_2 u_1 u_3 \\[2ex]
\dfrac{\partial u_2}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - d_3 u_2 u_4 + d_2 u_1 u_3 \\[2ex]
\dfrac{\partial u_3}{\partial t} = d_3 u_2 u_4 - d_2 u_1 u_3 \\[2ex]
\dfrac{\partial u_4}{\partial t} = -d_1 u_1 u_4 - d_3 u_2 u_4
\end{cases}
$$

初期条件

$$
(1.2)\quad
\begin{cases}
u_1(x,0) = u_{10}(x) \geqslant 0 \\
u_2(x,0) = u_{20}(x) \geqslant 0 \\
u_3(x,0) = u_{30}(x) \geqslant 0 \\
u_4(x,0) = u_{40}(x) \geqslant 0
\end{cases}
$$

但し、係数 d, d_1, d_2, d_3 はすべて正の定数とする。

ここでは差分法を用いることによって、解の存在，一意性を証明することを目的とする。

§2　準備

まず(1.1)式(1.2)式に対する差分方程式として次式を考える。

$$
(2.1)\quad
\begin{cases}
u_1^{n+1,j} = P(u_1^{n,j}) - k(d_1 u_1^{n+1,j} u_4^{n,j} + d_2 u_1^{n+1,j} u_3^{n,j}) \\
u_2^{n+1,j} = P(u_2^{n,j}) - k(d_3 u_2^{n+1,j} u_4^{n,j} - d_2 u_1^{n+1,j} u_3^{n,j}) \\
u_3^{n+1,j} = u_3^{n,j} + k(d_3 u_2^{n,j} u_4^{n+1,j} - d_2 u_1^{n,j} u_3^{n+1,j}) \\
u_4^{n+1,j} = u_4^{n,j} - k(d_1 u_1^{n,j} u_4^{n+1,j} + d_3 u_2^{n,j} u_4^{n+1,j})
\end{cases}
$$

初期条件

$$
(2.2)\quad
\begin{cases}
u_1^{0,j} = u_{10}^{j} \\
u_2^{0,j} = u_{20}^{j} \\
u_3^{0,j} = u_{30}^{j} \\
u_4^{0,j} = u_{40}^{j}
\end{cases}
$$

但し、$u_i^{n,j} = u_i(jh, nk)$，$i=1,2,3,4$（今後 u_i と書けば、$i=1,2,3,4$ を指すものとする。）$u_i^{n,j}$ は $R_h^T =$（R^T を格子間隔 (h,k) で区切った格子点座標）において考えることにする。

$P(u_2^{n,j}) = \lambda u_2^{n,j-1} + (1-2\lambda)u_2^{n,j} + \lambda u_2^{n,j+1}$，$\lambda = k/h^2 =$ 定数。

j, n はすべて整数であり、n, h, k は非負とする。

§3 解の存在

証明方法は本質的に、Courant-Friedrichs-Lewy [3]，並びに、F. John [5] に従っている。

先ず、次の補助定理を証明なしにあげておく。

<u>補助定理 1</u>　差分方程式(2.1)式(2.2)式の解が安定であるための十分条件は格子間隔比 λ が

$$1-2d\lambda \geqq 0 \quad (d \geqq 1) \quad \text{あるいは} \quad 1-2\lambda \geqq 0 \ (0<d<1)$$

を満たすことであり、その時、差分解は次式のように評価される。

$$(3.1)\quad \begin{cases} |u_1^n| \leqq |u_{10}| \\ |u_2^n| \leqq |u_{10}| + |u_{20}| \\ |u_3^n| \leqq |u_{30}| + |u_{40}| \\ |u_4^n| \leqq |u_{40}| \end{cases} \qquad \text{任意の } n, j \text{ に対して} \quad \text{且つ} \quad u_i^{n,j} \geqq 0$$

但し、$|u_i^n| = \sup_j |u_i^{n,j}|$

次に x に関する差分商，$(u_i^{n,j})_x = (u_i^{n,j+1} - u_i^{n,j})/h$ についての方程式系を(2.1)式(2.2)式から導くと次式で与えられる。

$$(3.2)\quad \begin{cases} (u_1^{n+1,j})_x = P_1((u_1^{n,j})_x) - k\Big[d_1(u_4^{n,j+1}(u_1^{n+1,j})_x + u_1^{n+1,j}(u_4^{n,j})_x) + \\ \qquad + d_2(u_3^{n,j+1}(u_1^{n+1,j})_x + u_1^{n+1,j}(u_3^{n,j})_x)\Big] \\ (u_2^{n+1,j})_x = P_2((u_2^{n,j})_x) - k\Big[d_3(u_4^{n,j+1}(u_2^{n+1,j})_x + u_2^{n+1,j}(u_4^{n,j})_x) + \\ \qquad - d_2(u_3^{n,j+1}(u_1^{n+1,j})_x + u_1^{n+1,j}(u_3^{n,j})_x)\Big] \\ (u_3^{n+1,j})_x = (u_3^{n,j})_x + k\Big[d_3(u_2^{n,j+1}(u_4^{n+1,j})_x + u_4^{n+1,j}(u_2^{n,j})_x) + \\ \qquad - d_2(u_1^{n,j+1}(u_3^{n+1,j})_x + u_3^{n+1,j}(u_1^{n,j})_x)\Big] \end{cases}$$

$$\left[\; (u_4^{n+1,j})_x = (u_4^{n,j})_x - k\Big[d_1\big(u_1^{n,j+1}(u_4^{n+1,j})_x + u_4^{n+1,j}(u_1^{n,j})_x\big) + d_3\big(u_2^{n,j+1}(u_4^{n+1,j})_x + u_4^{n+1,j}(u_2^{n,j})_x\big)\Big]\right.$$

初期条件

$$(u_i^{0,j})_x = (u_{i0}^{j})_x \tag{3.3}$$

(3.2) 式から次式を得る。

$$\left[\begin{array}{l}
|(u_1^{n+1})_x| \leqslant |(u_1^n)_x| + kDM_0\Big[|(u_4^n)_x| + |(u_3^n)_x|\Big] \\
|(u_2^{n+1})_x| \leqslant |(u_2^n)_x| + kDM_0\Big[|(u_4^n)_x| + |(u_3^n)_x| + |(u_1^{n+1})_x|\Big] \\
|(u_3^{n+1})_x| \leqslant |(u_3^n)_x| + kDM_0\Big[|(u_4^{n+1})_x| + |(u_2^n)_x| + |(u_1^n)_x|\Big] \\
|(u_4^{n+1})_x| \leqslant |(u_4^n)_x| + kDM_0\Big[|(u_1^n)_x| + |(u_{2}^n)_x|\Big]
\end{array}\right. \tag{3.4}$$

但し、$M_0 = \underset{i}{\mathrm{Max}}\{\underset{R_h^T}{\mathrm{Sup}}|u_i^{n,j}|\}$　　$D = \mathrm{Max}\{d_1, d_2, d_3\}$

故に (3.3) 式 (3.4) 式から次の評価式が導かれる。

$$\sum_{i=1}^{4}|(u_i^n)_x| \leqslant e^{4DM_0T}\Big(\sum_{i=1}^{4}|(u_{i0})_x|\Big) \tag{3.5}$$

さらに，t に関する差分商，$(u_i^{n,j})_t = (u_i^{n+1,j} - u_i^{n,j})/k$ についての方程式系を (2.1) 式 (2.2) 式から導くと，やはり (3.5) 式と同様な評価式が次式として与えられる。

$$(3.6)\quad \sum_{i=1}^{4}|(u_i^{n})_t| \leqq e^{4DM_0T}\left(\sum_{i=1}^{4}|(u_{i0})_t|\right)$$
$$\leqq e^{4DM_0T}\left(|(u_{10})_{xx}|+|(u_{20})_{xx}|+8DM_0^2\right)$$

(3.5)式，(3.6)式から，もしも初期値 u_{10}, u_{20}, u_{30}, u_{40} がそれぞれ $\mathcal{B}^2$, $\mathcal{B}^2$, $\mathcal{B}^1$, $\mathcal{B}^1$ クラスに属していれば，$(u_i^{n,j})_x$, $(u_i^{n,j})_t$ はともに h に無関係に有界となる。同様な議論により，もしも u_{10}, u_{20}, u_{30}, u_{40} がそれぞれ $\mathcal{B}^4$, $\mathcal{B}^4$, $\mathcal{B}^3$, $\mathcal{B}^3$ クラスに属していれば，$u_i^{n,j}$, $(u_i^{n,j})_x$, $(u_i^{n,j})_{xx}$, $(u_i^{n,j})_{xxx}$, $(u_i^{n,j})_t$, $(u_i^{n,j})_{tx}$, $(u_i^{n,j})_{tt}$, $(u_i^{n,j})_{txx}$ はすべて h に無関係に有界となる。

次に格子点座標 R_h^T を可算個の格子点にするために，以下のことを行う。h_0 を任意の固定した正数とし，正整数 m に対して，格子間隔（$h_m=h_0/2^m$, $k_m=\lambda h_m^2$）の格子点座標 $R_{h_m}^T$ を作り，$R_{h_\infty}^T=\bigcup_m R_{h_m}^T$ と定義すれば，この集合 $R_{h_\infty}^T$ は可算個で，R^T において到る所，稠密な集合となる。

こうしておいて，$R_{h_m}^T$ で定義される格子点函数 $u_{im}^{n,j}$ から成る列 $\{u_{im}^{n,j}\}$ の中から適当な部分列 $\{u_{im_s}^{n,j}\}$ を取りだせば，

$$(3.7)\quad \lim_{m_s\to\infty} u_{im_s}^{n,j}=u_i(x,t) \quad \text{in } R_{h_\infty}^T$$

となる。次に $R_{h_\infty}^T$ 上の2点（$x=jh_m$, $t=nk_m$），（$x'=j'h_m$, $t'=n'k_m$）において定義される $u_{im}^{n,j}$, $u_{im}^{n',j'}$ に対して，$(u_i^{n,j})_x$, $(u_i^{n,j})_t$ がともに h に無関係に有界とすれば，次式を得る。

$$(3.8)\qquad u_{im}^{n,j} - u_{im}^{n',j'} = h_m \sum_{\nu=1}^{|j-j'|} (u_{im}^{n,j'+\nu-1})_x + k_m \sum_{\mu=1}^{|n-n'|} (u_{im}^{n'+\mu-1,j'})_t$$

$$= O(x-x') + O(t-t')$$

ここで $m_s \to \infty$ とすれば，

$$u_i(x,t) - u_i(x',t') = O(x-x') + O(t-t') \quad \text{in } R_{h\infty}^T$$

を得る。上式から，極限函数 $u_i(x,t)$ は $R_{h\infty}^T$ において一様連続となるから，その定義域は R^T まで拡張される。そしてそこにおいて有界で一様連続となる。更に，$(u_i^{n,j})_{xx}$ が一様に有界であれば，次式を得る。

$$\frac{u_{im}^{n,j'} - u_{im}^{n,j}}{x'-x} = (u_{im}^{n,j})_x + O(x'-x)$$

ここで $m_s \to \infty$ とすれば，次式を得る。

$$(3.9)\qquad \frac{u(x',t) - u(x,t)}{x'-x} = v_i(x,t) + O(x'-x) \quad \text{in } R_{h\infty}^T$$

但し，$\lim_{m_s \to \infty} (u_{im}^{n,j})_x = v_i(x,t)$

ここで，$(u_i^{n,j})_{xx}$，$(u_i^{n,j})_{xt}$ がともに h に無関係に有界であれば，$v_i(x,t)$ は上と同様な議論により，$R_{h\infty}^T$ において一様連続となるから，(3.9)式は R^T において成立つ。そこで $x' \to x$ とすれば，

$$\frac{\partial}{\partial x} u_i(x,t) = v_i(x,t) \qquad \text{in } R^T$$

を得る。

もしも初期値 $u_{10}, u_{20}, u_{30}, u_{40}$ がそれぞれ $\mathcal{B}^4, \mathcal{B}^4, \mathcal{B}^3, \mathcal{B}^3$ クラスに属していると仮定すれば、同様な方法により、$(u_i^{n,j})_{xx}$, $(u_i^{n,j})_t$ がそれぞれ $\frac{\partial^2}{\partial x^2}u_i(x,t)$, $\frac{\partial}{\partial t}u_i(x,t)$ に収束し、R^T において有界で一様連続となることがわかる。最後に、(2.1)式(2.2)式において、格子間隔を $(h=h_m, k=k_m)$ として、$m_j \to \infty$ とすれば、$u_i(x,t)$ は (1.1)式 (1.2)式を $R^T_{h\infty}$ において満たし、更に一様連続性より R^T においてそれらを満たすことがわかる。こうして極限函数 $u_i(x,t)$ が (1.1)式 (1.2)式の解になることが証明される。しかしながら、以上の証明では、必要以上に高階の導函数の連続性を初期値に対して要求した。これに対して、熱方程式の基本解を用い、その性質を利用することより、初期値 $u_{10}, u_{20}, u_{30}, u_{40}$ がそれぞれ $\mathcal{B}^2, \mathcal{B}^2, \mathcal{B}^1, \mathcal{B}^1$ クラスに属していれば、(1.1)式(1.2)式の解が存在することがわかる。こうして次の定理を得る。

<u>定理1</u> もしも初期値 $u_{10}, u_{20}, u_{30}, u_{40}$ が非負で、それぞれ $\mathcal{B}^2, \mathcal{B}^2, \mathcal{B}^1, \mathcal{B}^1$ クラスに属していれば、問題 (1.1)式 (1.2)式の真の解が存在し、その時

$$\left.\begin{array}{l} u_1(x,t),\ u_2(x,t) \in \mathcal{E}_t^0(\mathcal{B}^2) \cap \mathcal{E}_t^1(\mathcal{B}^0) \\ u_3(x,t),\ u_4(x,t) \in \mathcal{E}_t^1(\mathcal{B}^1) \cap \mathcal{E}_t^2(\mathcal{B}^0) \end{array}\right. \quad \text{in } R^T$$

を満たす。

§4．解の一意性

補助定理．2　もしも $u_i(x,t)$ が (1.1) 式，(1.2) 式の解であり，且つ

$$u_1(x,t),\ u_2(x,t) \in \mathcal{E}_t^0(\mathcal{B}^2) \cap \mathcal{E}_t^1(\mathcal{B}^0)$$

$$u_3(x,t),\ u_4(x,t) \in \mathcal{E}_t^1(\mathcal{B}^0)$$

を満たし，更に $u_i^{n,j}$ が補助定理 1 の仮定のもとで，(2.1) 式 (2.2) 式の解とすれば，任意の ε に対して次式を満たす $\delta(\varepsilon)$ が存在する。

$$\sum_{i=1}^{4} \| u_i^{n,j} - u_i(x,t) \| < \varepsilon \quad , \quad 0 < k, h \leq \delta \quad \text{in } R_h^T$$

但し，$x = jh,\ t = nk,\quad \|u_i\| = \sup_{R_h^T} |u_i(x,t)|$

（証明）　先ず $u_1(x,t)$ に対して，仮定より次式を得る。

$$u_1(x,t+k) = P_1(u_1(x,t)) - k\Big[d_1 u_1(x,t+k)\, u_4(x,t) + d_2 u_1(x,t+k) \times u_3(x,t)\Big] + o(k) \tag{4.1}$$

ここで，(2.1) 式の第一式から (4.1) 式を両辺それぞれ差しひき，$S_i^{n,j} = u_i^{n,j} - u_i(x,t)$ と置けば次式を得る。

$$S_1^{n+1,j} = P_1(S_1^{n,j}) - k\Big[(d_1 u_4^{n,j} + d_2 u_3^{n,j})\, S_1^{n+1,j} + f_1\Big] + o(k) \tag{4.2}$$

但し

$$f_1 = (d_1 S_4^{n,j} + d_2 S_3^{n,j})\, u_1(x,t+k) \tag{4.3}$$

同様な方法により，$S_2^{n,j}$, $S_3^{n,j}$, $S_4^{n,j}$ に対する方程式も得ることができる。

(4.4) $$S_2^{n+1,j} = P_2(S_2^{n,j}) - k\left[d_3 u_4^{n,j} S_2^{n+1,j} + f_2\right] + o(k)$$

(4.5) $$S_3^{n+1,j} = S_3^{n,j} - k\left[d_2 u_1^{n,j} S_3^{n+1,j} + f_3\right] + o(k)$$

(4.6) $$S_4^{n+1,j} = S_4^{n,j} - k\left[(d_1 u_1^{n,j} + d_3 u_2^{n,j}) S_4^{n+1,j} + f_4\right] + o(k)$$

但し

(4.7) $$f_2 = d_3 u_2(x,t+k) S_4^{n,j} - d_2 (u_1(x,t+k) S_3^{n,j} + u_3^{n,j} S_1^{n+1,j})$$

(4.8) $$f_3 = d_2 u_3(x,t+k) S_1^{n,j} - d_3 (u_4(x,t+k) S_2^{n,j} + u_2^{n,j} S_4^{n+1,j})$$

(4.9) $$f_4 = (d_1 S_1^{n,j} + d_3 S_2^{n,j}) u_4(x,t+k)$$

初期条件

(4.10) $$S_i^{0,j} \equiv 0$$

ここで，$S_i^{n,j}$ に対して次式の差分方程式系を考える。

(4.11) $$\left[\begin{array}{l} y_1^{n+1,j} = P_1(y_1^{n,j}) + k(F_1 + G_1) \\ y_2^{n+1,j} = P_2(y_2^{n,j}) + k(F_2 + G_2) \\ y_3^{n+1,j} = y_3^{n,j} + k(F_3 + G_3) \\ y_4^{n+1,j} = y_4^{n,j} + k(F_4 + G_4) \end{array}\right.$$

初期条件

(4.12) $$y_i^{0,j} \equiv 0$$

但し、F_i は R_h^T における f_i の上限であり、G_i は R_h における $O(h^2)/k$ の上限であり、$k \to 0$ の時、0 に Tend するものである。

(4.11) 式、(4.12) 式から容易に次式を得る。

$$y_i^{n.j} = t\left[F_i + G_i \right] \tag{4.13}$$

一方、(4.2) 式〜(4.12) 式から

$$|S_i^{n.j}| \leqq y_i^{n.j} \tag{4.14}$$

が導かれるから、結局次式を得る。

$$\| S_i^{n.j} \| \leqq T\left[F_i + G_i \right] \tag{4.15}$$

上式の両辺を i について加えると、

$$\sum_{i=1}^{4} \| S_i^{n.j} \| \leqq \sum_{i=1}^{4} T\left[F_i + G_i \right] \tag{4.16}$$

となる。他方、(4.3) 式、(4.7) 式〜(4.9) 式から次式が導かれる。

$$\sum_{i=1}^{4} F_i \leqq 3DM_0 \left\{ \sum_{i=1}^{4} \| S_i^{n.j} \| \right\} \tag{4.17}$$

(4.16) 式、(4.17) 式より、

$$(1 - 3DM_0 T) \sum_{i=1}^{4} \| S_i^{n.j} \| \leqq T \sum_{i=1}^{4} G_i \tag{4.18}$$

上式から、明らかなように $T_1 < 1/3DM_0$ とすれば、次式が導かれる。

$$\lim_{k \to 0} \sum_{i=1}^{4} \| S_i^{n.j} \| = 0 \qquad \text{in } R_h^{T_1} . \tag{4.19}$$

ここで，T_1を決定する定数M_0はR^{T}での$u_i(x.t)$の maximum norm であったことに注意すれば，T_1を新しい初期時刻と考え，上と同様な方法を行えば，$T_1 \leq t \leq T_2$において(4.19)式を満たすようなT_2が取れる。更に，有限回同じ操作を続けて行けば，R^{T}において

$$\lim_{k \to 0} \sum_{i=1}^{4} \| S_i^{n.j} \| = 0$$

が証明される。

<u>定理 2</u> もしも，補助定理 2の仮定のもとに，(1.1)式，(1.2)式の真の解が存在するならば，その解は一意である。

(証明) (1.1)式，(1.2)式を満たす任意の2つの真の解を，$w_i^1(x.t)$，$w_i^2(x.t)$とすれば

$$\sum_{i=1}^{4} \| w_i^1 - w_i^2 \| \leq \sum_{i=1}^{4} \{ \| w_i^1 - u_i^{n.j} \| + \| w_i^2 - u_i^{n.j} \| \} \qquad \text{in } R_h^{T}$$

但し，$u_i^{n.j}$は(2.1)式(2.2)式の差分解とする。

補助定理 2より

$$\lim_{k \to 0} \sum_{i=1}^{4} \| w_i^1 - w_i^2 \| = 0 \qquad \text{in } R_{\infty}^{T}$$

となり，w_i^1，w_i^2の一様連続性よりR^{T}において$w_i^1(x.t) \equiv w_i^2(x.t)$が容易に証明される。

§5 結び

以上で初期値問題(1.1)式, (1.2)式に対する解の存在, 一意性が証明されたが, まだ問題は少し残っている。才一に, ここで考えた系は二次反応であると仮定しているが, 高次反応の場合にはどうか? 才二に, 実際的には混合問題として考えられる場合が多いが, それについては?
これらについては現在, まだ未解決である。

参考文献

[1] R. Arima and Y. Hasegawa; On Global Solutions for Mixed Problem of a Semi-linear Differential Equation. Proceeding of the Japan Acad. Vol 39, No.10, (1963)

[2] P. L. T. Brian, etc; Penetration Theory for a Gas Absorption Accompanied by a Second Order Chemical Reaction. A. I. Ch. E. Journal. 7. 226 (1961)

[3] R. Courant, K. Friedrichs and H. Lewy; Ueber die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik, Math. Annalen. vol. 100. (1928)

[4] J. Crank; "Mathematics of Diffusion." Clarendon Press, Oxford, (1955)

[5] J. Fritz; On Integration of Parabolic Equations by Difference Methods. C. P. A. M. vol 5 (1952)

[6] G. E. Forsythe and W. R. Wasow; Finite Difference Methods for Partial Differential Equation. John Wiley and Sons INC. (1960)

[7] T. Nogi; Private communication (1964)